

РЕЛЯТИВИСТСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ИМПУЛЬСОВ

И. В. Кочиков^a, *Р. Дж. Дуэйн Миллер*^{b,c*}, *А. А. Ищенко*^{d**}

^a *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
Научно-исследовательский вычислительный центр
119991, Москва, Россия*

^b *The Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter,
Hamburg Centre for Ultrafast Imaging
22761, Hamburg, Germany*

^c *Факультеты химии и физики Университета Торонто
M5S 3H6, Торонто, Канада*

^d *МИРЭА — Российский технологический университет
119571, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 29 июня 2018 г.,
после переработки 14 сентября 2018 г.
Принята к публикации 17 сентября 2018 г.

Рассматривается динамика электронного импульса в области дрейфа, где отсутствуют ускоряющие поля, причем особое внимание уделяется оценке параметров, существенных для атомной визуализации, т. е. для непосредственного наблюдения динамики атомов. Электронный пучок моделируется как система N частиц с $N = 1000$ и $N = 10000$ электронов. Пучок распространяется в течение определенного периода времени (от 1 до 4 нс). Вычисляются параметры распределения электронов по координатам и скоростям, характеризующие временной профиль и неопределенность длины волны электронов в образце. Нерелятивистское приближение дает удовлетворительные результаты (с погрешностью ниже 15 %) при моделировании удлинения и уширения коротких электронных импульсов с энергиями до 30 кэВ. Результаты такого моделирования могут быть весьма неточными для промежуточных энергий (300 кэВ), а для быстрых релятивистских пучков (3 МэВ) они становятся совершенно неверными. Предлагается решение задачи, позволяющее получить количественные оценки. Использование импульсов высоких энергий приводит к почти полному исчезновению эффекта кулоновского отталкивания. Дисперсия скоростей электронов при более высоких энергиях также значительно уменьшается. Для электронов с энергией 3 МэВ длительность электронного импульса, а также его радиус заметно не меняются даже после распространения пучка в течение 4 нс (что соответствует расстоянию 1.2 м). Даже при энергии 300 кэВ увеличение длительности импульса пренебрежимо мало при времени пролета электронов до 1 нс (расстояние 0.2 м). Обобщена упрощенная модель среднего поля [13] на релятивистские электронные импульсы. Ее результаты находятся в хорошем соответствии с прямым динамическим моделированием.

DOI: 10.1134/S0044451019030015

1. ВВЕДЕНИЕ

Определение характеристик структурной динамики вещества с высоким пространственно-временным разрешением открывает новое понимание взаимосвязи элементов триады «структура–динамика–функция» в физике, химии, биологии и материа-

ловедении (см. обзоры [1–4]). Методы сверхбыстрой электронной микроскопии, электронной дифракции, электронной кристаллографии и нанокристаллографии открыли возможность изучения когерентной структурной динамики вещества. Ключевым параметром экспериментальных установок сверхбыстрой электронной микроскопии и электронографии является временное разрешение, введенное в работах [5, 6], которое определяется длительностью электронных импульсов. Известно, что дли-

* R. J. Dwayne Miller

** E-mail: aischenko@yasenevo.ru

тельность фотоэлектронного импульса в непосредственной близости от фотокатода равна длительности импульса лазера накачки [7]. Однако из-за кулоновского отталкивания и разброса скоростей фотоэлектронов сверхкороткие электронные сгустки, движущиеся от фотокатода к образцу, размываются при приближении к исследуемому образцу. Понимание динамики кулоновского отталкивания электронов имеет решающее значение для проектирования технологий следующего поколения [7–11].

Проблема уширения и удлинения ультракоротких электронных импульсов вследствие кулоновского отталкивания неоднократно рассматривалась в научной литературе (см. недавнюю обзорную работу [12]). До недавнего времени эффекты отталкивания оценивались с помощью простых аналитических моделей. Однако современные вычислительные средства позволяют проводить прямое численное моделирование ансамбля электронов (во всяком случае до $N = 10^5$ электронов), распространяющихся в области между ускоряющим блоком и образцом.

Влияние кулоновского отталкивания на распространение электронов было подробно рассмотрено в работе [13], в которой было получено эффективное и точное решение задачи. Дальнейшие улучшения для случаев более высоких плотностей заряда были предложены в работах [14–28]¹⁾.

Настоящая статья посвящена динамике распространения электронных импульсов в так называемой дрейфовой области, где на них не влияют внешние поля. Эта задача подробно обсуждалась в работе [13], в которой, однако, не учитывались релятивистские эффекты. Нерелятивистское приближение вполне оправдано для электронных пучков с энергией 30 кэВ, рассматриваемых в этой работе, однако последующие исследования показали, что уже при энергиях 200–300 кэВ релятивистские эффекты становятся сильнее, чем можно было бы ожидать, а для импульсов 1 МэВ и выше картина удлинения импульса совершенно изменяется [16, 27, 28]. Для упрощения сравнения результатов с упомянутой работой [13] в дальнейшем будем рассматривать короткий электронный импульс длительностью 90 фс и диаметром 0.5 мм. В этих условиях электронный импульс напоминает плоский диск толщиной (вдоль оси распространения) не более 27 мкм. Первоначальное распределение заряда предполагается гауссовым по всем трем координатам. Будем

исследовать электронные пучки с энергиями 30, 300 и 3000 кэВ, для которых релятивистские эффекты проявляются соответственно пренебрежимо слабо, значительно и сильно. Эти энергии соответствуют скоростям электронов 0.328*c*, 0.777*c*, 0.989*c* и значениям релятивистского фактора γ , равным 1.0587, 1.587 и 6.87. Начальная дисперсия энергий электронов задавалась на уровне 0.6 эВ.

Электронный пучок моделировался известными методами классической молекулярной динамики как система взаимодействующих частиц. Моделируемая система состояла из $N = 1000$ и $N = 10000$ электронов. Пучок распространялся в течение определенного периода времени (от 1 до 4 нс). Во время моделирования его распространения записывались параметры распределения электронов по координатам и скоростям. На заданном расстоянии, установленном в соответствии с выбранным временем распространения, регистрировались времена прилета электронов, что позволило определять временную протяженность электронного сгустка. В то же время определялось распределение электронов по энергиям в плоскости регистрирующей системы (детектора), позволяющее вычислять неопределенность длинны волны электрона в образце.

Число электронов в этом исследовании было ограничено как общими соображениями, так и вычислительными возможностями. Моделирование движения системы из 10^4 электронов потребовало 1.3 с на один временной шаг на ПК с распараллеливанием вычислений. С некоторой корректировкой вычислительного алгоритма возможно и моделирование $N = 10^5$ электронов (при увеличении числа электронов время моделирования возрастает как N^2).

В настоящей работе при рассмотрении влияния пространственного заряда (кулоновских эффектов) особое внимание уделяется параметрам, которые влияют на возможность непосредственного наблюдения динамики атомов. Эта работа определяет фундаментальные пространственные и временные пределы, в которых возможна атомная визуализация с использованием электронных пучков, а также предлагает простые методы определения параметров, необходимых для достижения желаемого пространственно-временного разрешения с максимально возможными отношением сигнала к шуму и/или контрастностью изображения.

2. МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для интегрирования динамических уравнений использовался алгоритм Верле [29]. Эта схема ши-

¹⁾ Код GPT [15] использован для расчетов, включающих 10^5 частиц, с тем же начальным изотропным распределением импульсов электронов, что и в [14].

роко используется в молекулярной динамике и хорошо изучена в отношении выбора шага по времени, устойчивости, сохранения энергии и других интегралов движения и т. д. Уравнения этой схемы записываются в виде

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \mathbf{a}(t)(\Delta t)^2,$$

или (в схеме со скоростями):

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)(\Delta t)^2,$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}[\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)]\Delta t.$$

Ускорение $\mathbf{a}(t)$, входящее в эти уравнения, можно найти из соотношения

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} = e(\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]),$$

где \mathbf{F} — сила Лоренца, \mathbf{E} и \mathbf{B} — соответственно напряженность электрического поля и магнитная индукция. Последнее уравнение можно разрешить относительно ускорения:

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\gamma m} \left\{ \mathbf{F} - \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{F})\mathbf{v}}{c^2} \right\},$$

где $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Электрическое и магнитное поля, создаваемые одним движущимся электроном, определяются путем дифференцирования запаздывающих потенциалов Лиенара – Вихерта [30]:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R(1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})},$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0 c}{4\pi} \frac{e\boldsymbol{\beta}}{R(1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})} = \frac{\boldsymbol{\beta}(t_r)}{c} \varphi(\mathbf{r}, t),$$

где \mathbf{r} — точка пространства, в которой вычисляется поле, \mathbf{r}_0 — положение источника (электрона), $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$, $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$, $\mathbf{n} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)/R$, а все значения \mathbf{R} , $\boldsymbol{\beta}$ и \mathbf{n} вычисляются с учетом запаздывания, т. е. для положения источника в более ранний момент времени:

$$t_r = t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t_r)|}{c}.$$

Если заряд Q движется без ускорения, то его поля можно записать как

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{dQ}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}}{\gamma^2(1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta})^3 R^2},$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} [\mathbf{v} \times \mathbf{E}].$$

Здесь снова все значения в правой части вычисляются при $t = t_r$. Эти уравнения могут быть переписаны так, чтобы включать только текущее время, но подобная модификация возможна только для равномерно движущихся зарядов.

В электронном пучке электроны не движутся равномерно, однако их относительные движения происходят при нерелятивистских скоростях (до 10^5 м/с, как показывают расчеты), и, следовательно, эффекты неравномерности движения пренебрежимо малы, в то время как схема моделирования значительно усложняется.

Величина шага моделирования выбиралась таким образом, чтобы изменение расстояний за один временной шаг было намного меньше, чем среднее расстояние между электронами с наибольшими относительными скоростями до 50000 м/с. Другим критерием выбора шага по времени была независимость результатов моделирования от величины шага. С учетом того, что в этом исследовании средние расстояния между электронами в импульсе составляли от 9 до 19 мкм, было найдено, что удовлетворительная точность моделирования достигается при временном шаге в 2–5 пс.

В многочастичной задаче, рассматриваемой в этой работе, определяющее значение имеет адекватное моделирование интегральных свойств электронного сгустка (например, распределение электронов в фазовом пространстве – по положению и по скоростям), а не точное воспроизведение траекторий отдельных электронов. Устойчивость полученных распределений контролировалась в ходе моделирования путем проверки сохранения интегралов движения и проведения множества вычислительных экспериментов с псевдослучайными начальными данными.

Другим возможным подходом к численному моделированию может быть решение нерелятивистской динамической задачи в системе координат, движущейся со средней скоростью импульса, с последующим преобразованием результатов в лабораторную систему отсчета. Этот подход, однако, приводит к получению положений электронов пучка в лабораторной системе в разные моменты времени и, во всяком случае, требует отдельного преобразования координат и скоростей для каждой частицы. Хотя мы и не используем этот подход в динамическом моделировании, он применяется при построении релятивистской формы аналитической модели среднего поля в разд. 4 настоящей статьи.

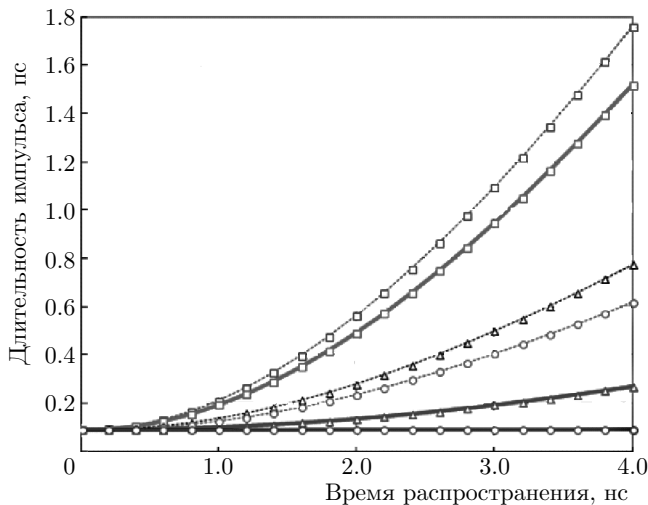


Рис. 1. (В цвете онлайн) Длительности импульса для разных моделей распространения и энергий электронов. Результаты релятивистской модели показаны сплошными линиями, результаты статической кулоновской модели — пунктирными линиями. Энергии соответствуют 30 кэВ (квадраты), 300 кэВ (треугольники) и 3 МэВ (кружки)

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

При моделировании динамики электронов мы ожидаем, что вследствие сил кулоновского отталкивания электронный сгусток будет расширяться по всем направлениям. Кроме того, мы ожидаем увеличения разброса электронов по энергиям (скоростям), поскольку более медленные электроны в конце сгустка будут дополнительно замедляться опережающими электронами, а электроны в начале сгустка будут ускоряться отстающими электронами.

В релятивистском случае следует ожидать меньшего уширения распределения электронов по скоростям. Одна из причин заключается в том, что сила отталкивания электронов, движущихся в одном направлении, уменьшается за счет появления магнитного поля. Другая причина состоит в увеличении массы высокоэнергетических электронов и, следовательно, в уменьшении их ускорения. Эти факторы уменьшают ускорение отталкивания в γ^2 раз для параллельно движущихся электронов и с еще большим коэффициентом γ^5 для электронов, следующих друг за другом по одной траектории. Величина эффекта зависит и от формы электронного импульса.

Результаты нерелятивистского моделирования в сравнении с релятивистским показаны ниже на рисунках, где приведены данные для сгустка, содержащего $N = 10000$ электронов, для энергий 30 кэВ, 300 кэВ и 3 МэВ. Длительности импульса для раз-

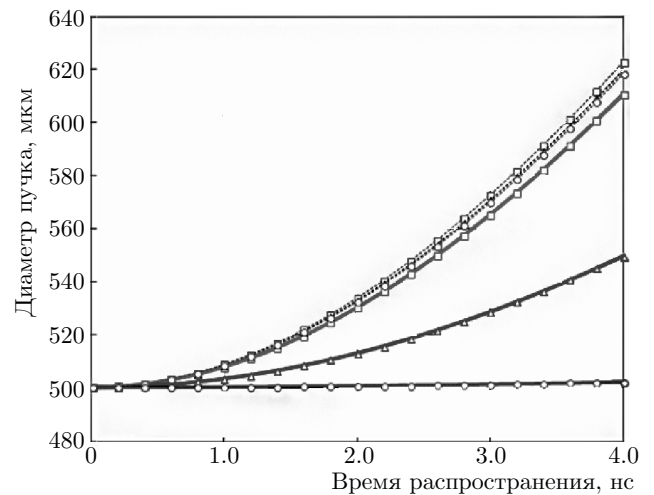


Рис. 2. (В цвете онлайн) Диаметры электронного сгустка для разных моделей распространения и энергий электронов. Результаты релятивистской модели показаны сплошными линиями, результаты статической кулоновской модели — пунктирными линиями. Энергии соответствуют 30 кэВ (квадраты), 300 кэВ (треугольники) и 3 МэВ (кружки)

ных моделей распространения и энергий электронов приведены на рис. 1.

Отметим, что даже в нерелятивистском приближении результаты моделирования оказываются различными для разных энергий электронов. Это объясняется тем, что при фиксированной длительности начального импульса его геометрическая длина больше для более высоких энергий (и, соответственно, средней скорости электронов) и кулоновское взаимодействие уменьшается из-за увеличения среднего расстояния между электронами. Уменьшение длительности импульса для случаев с высокой энергией оказывается значительным. Это уменьшение становится еще более существенным, если сравнивать результаты не для одинакового времени распространения, а для одинакового расстояния до обреза. Тот же эффект, хотя и в меньшей степени, наблюдается для диаметра электронного сгустка (рис. 2). В этом случае нерелятивистское приближение дает одинаковые результаты для разных энергий (рис. 2).

Для объяснения показанного выше поведения размеров электронного импульса в продольном и поперечном направлениях полезно рассмотреть эволюцию распределения электронов по скоростям во время распространения импульса. На рис. 3 видно, что для низкоэнергетических электронов дисперсия их скоростей близка к изотропной, в то время как в слу-

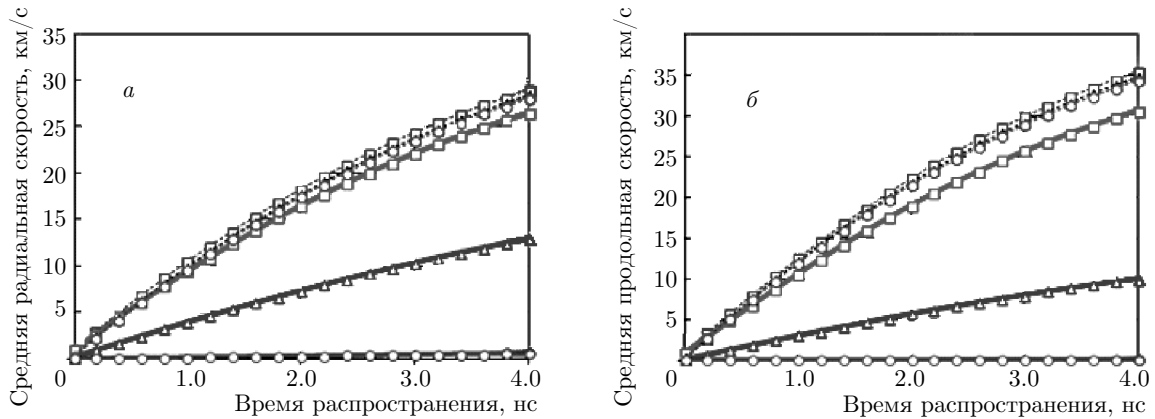


Рис. 3. (В цвете онлайн) Средние радиальная (*a*) и продольная (*б*) составляющие скорости электронов в импульсе в течение времени распространения. Обозначения совпадают с обозначениями рис. 1, 2. График продольной скорости соответствует ее отклонению от средней скорости пучка

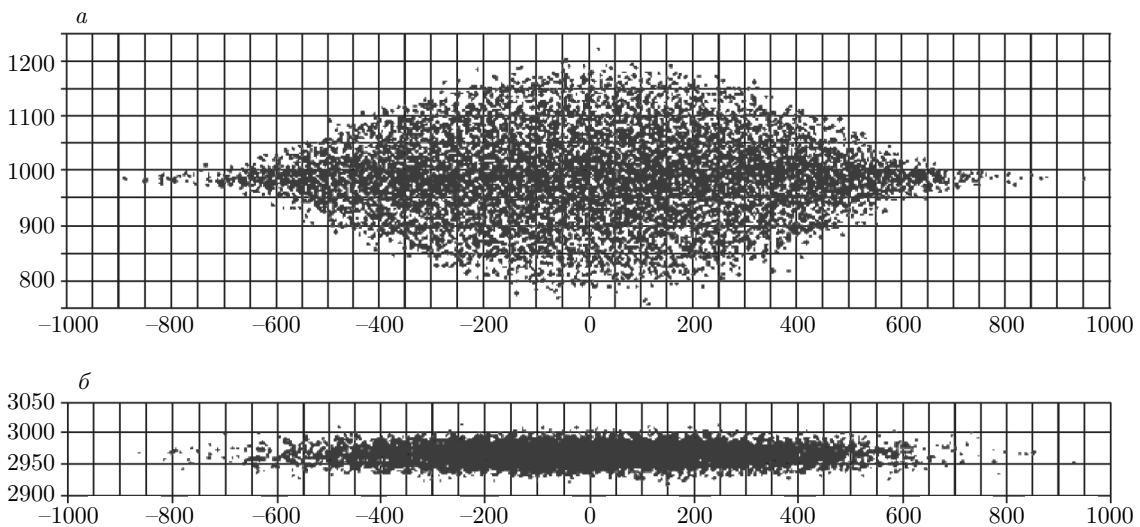


Рис. 4. (В цвете онлайн) Форма импульса с 10000 электронами после распространения в течение 4 нс для импульсов с энергиями 30 кэВ (*a*) и 3 МэВ (*б*). Все размеры указаны в мкм

чае высоких энергий разброс продольных скоростей подавляется в гораздо большей степени, чем разброс радиальных скоростей. Моделирование в нерелятивистском приближении не учитывает этих эффектов.

Как уже было отмечено выше, в течение времени распространения исходный импульс расширяется во всех направлениях. Как правило, прямое моделирование позволяет получить гораздо более подробную информацию о динамике пучка, чем обычные приблизительные оценки, хотя это и достигается за счет больших вычислительных затрат. В качестве примера приведем два изображения электронных сгустков с энергиями электронов 30 кэВ и 3 МэВ (рис. 4).

Численное моделирование позволяет проследить эволюцию электронной плотности в процессе распространения электронного сгустка. Для сгустков, представляющих собой равномерно заряженные сфероиды, было обнаружено, что форма сгустка и равномерное распределение заряда в нем сохраняются в процессе распространения. Этот вывод был подтвержден как приближенными теоретическими моделями, так и прямым молекулярно-динамическим моделированием [31]. Однако недавнее исследование электронного облака с гауссовым начальным распределением плотности показало, что профиль электронной плотности со временем изменяет свою форму, причем в пери-

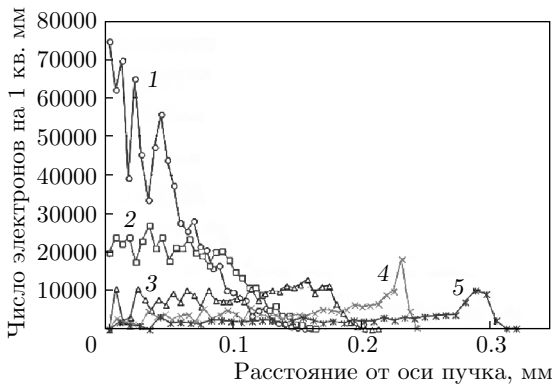


Рис. 5. (В цвете онлайн) Эволюция распределения плотности электронов в электронном сгустке в процессе его распространения: кривая 1 — через 0 нс; 2 — 0.5 нс; 3 — 1 нс; 4 — 1.5 нс; 5 — 2 нс. Начальное распределение электронов гауссово, сгусток содержит 50000 электронов

ферийных областях облака возникают максимумы плотности заряда [17]. Мы подтвердили эти результаты путем моделирования дрейфа электронных пучков с энергиями 100 и 300 кэВ. Численные эксперименты охватывали случаи с различными начальными условиями, в том числе электронные облака сфероидальной и цилиндрической формы как с однородной электронной плотностью, так и с плотностью, описываемой гауссовым распределением. На рис. 5 и 6 показаны радиальный профиль плотности и распределение электронов в тонком слое, вырезанном из середины электронного сгустка с начальным диаметром 0.1 мм и энергией 100 кэВ.

Моделирование с начальным равномерным распределением заряда и сфероидальной формой облака приводит к соответствующим образом масштабированным однородным профилям плотности. Наше моделирование подтверждает результаты работ [28, 31]. Эксперименты с меньшим числом электронов ($N = 10000$ и $N = 2000$) показывают, что уширение пучка и появление ударной волны плотности требуют большего времени распространения, но в остальном существенные особенности процесса остаются неизменными.

4. АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РЕЛЯТИВИСТСКОГО СЛУЧАЯ

Существует простая теоретическая модель, предсказывающая удлинение электронного импульса вследствие отталкивания электронов (см. цитированную работу Сивика и др. [13], а также [18, 22, 32–34]). Она основана на вычислении сред-

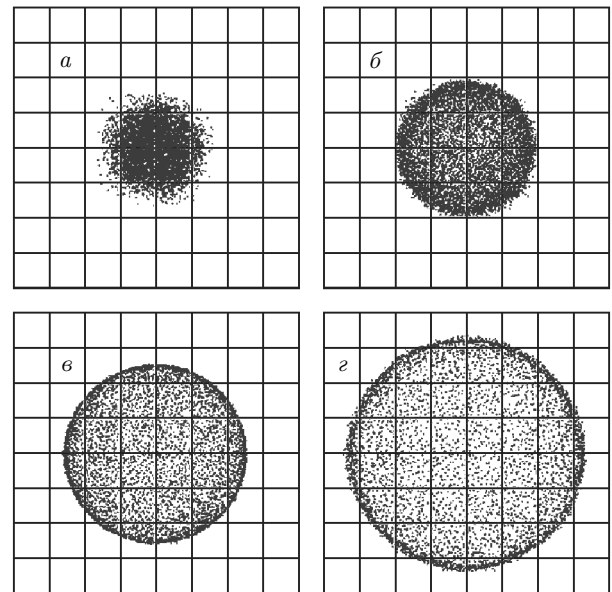


Рис. 6. (В цвете онлайн) Распределение 5000 электронов в тонком слое, вырезанном из середины электронного сгустка, через 0.25 нс (а), 0.5 нс (б), 0.75 нс (в) и 1 нс (г) после его распространения. Сторона каждого квадрата равна 0.1 мм

него кулоновского поля электронов, действующего на один выбранный электрон на переднем (или заднем) фронте импульса. Сначала вычисляется электрический потенциал заряженного диска на его оси симметрии:

$$V(z) = \frac{Ne^2}{2\pi\epsilon_0 a^2} \left(\sqrt{z^2 + a^2} - z \right), \quad (1)$$

где a — радиус диска, координата z измеряется от центра диска. Обозначим толщину диска как l . Для электрона на переднем крае диска ($z = l/2$) ускоряющая электрическая сила равна

$$m \frac{dv_z}{dt} \Big|_{z=l/2} = \frac{Ne^2}{2\pi\epsilon_0 a^2} \left[1 - \frac{l}{\sqrt{l^2 + 4a^2}} \right]. \quad (2)$$

В то же время длина импульса (взятого как расстояние между электронами на переднем и заднем краях диска) удовлетворяет условию

$$\frac{dl}{dt} = 2v_z.$$

В нашем исследовании эта модель была применена в нерелятивистском приближении с небольшими изменениями для учета различных форм электронного сгустка. Уравнение (1) было выведено для равномерно заряженного диска радиуса a . Если предположить гауссово распределение плотности заряда,

$$\rho(r) = \frac{Q}{2\pi a^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right),$$

результат для потенциала на оси z становится равным

$$\begin{aligned} V(z) &= \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 a^2} \exp\left(\frac{z^2}{2a^2}\right) \int_z^\infty \exp\left(-\frac{u^2}{2a^2}\right) du = \\ &= \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 a} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp\left(\frac{z^2}{2a^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{a\sqrt{2}}\right), \end{aligned}$$

что для напряженности электрического поля дает

$$E(z) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 a^2} \left[1 - \frac{z}{a} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp\left(\frac{z^2}{2a^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{a\sqrt{2}}\right)\right].$$

Здесь $\operatorname{erfc}(x) = (2/\sqrt{\pi}) \int_x^\infty \exp(-t^2) dt$. Значение отталкивающей силы $eE(z)$ использовалось вместо правой части в уравнении (2).

Мы нашли удовлетворительное согласие аналитической схемы с результатами моделирования в нерелятивистском приближении, хотя эффективное число электронов, принятое равным $N/2$ в работе [13], для лучшего соответствия результатов оказалось необходимым заменить на $N/3.5$. Это различие обусловлено более существенным экранированием зарядов для гауссова распределения, а также несколько иным определением длительности импульса.

Простейшим способом распространения этой аналитической модели на релятивистский случай является переход в систему координат, движущуюся вместе с импульсом (где применимо нерелятивистское приближение) с последующим обратным переходом в лабораторную систему отсчета. Рассмотрим два электрона в передней и задней частях электронного импульса. Введем функцию $L_0(l_0, t)$, которая является решением нерелятивистского уравнения (2) с начальными условиями $l(0) = l_0$, $v(0) = 0$.

В начальный момент времени координаты электронов в лабораторной системе отсчета равны $z_1 = z_0$, $z_2 = -z_0$, где $z_0 = L_0(l_0, t)/2$, а их скорости равны скорости облака. В системе отсчета, связанной с электронным сгустком, координаты электронов есть γz_0 и $-\gamma z_0$ в моменты времени $t'_1 = -t_0$, $t'_2 = t_0$, $t_0 = \gamma V z_0/c^2$. Решение уравнений в этой движущейся системе дает

$$z'_1(t') = \frac{1}{2} L_0(\gamma l_0, t' - t'_0), \quad z'_2(t') = -\frac{1}{2} L_0(\gamma l_0, t' + t'_0).$$

Поправка t_0 для моментов времени фактически несущественна, поскольку в системе электронного

сгустка $t_0 = \gamma \beta z_0 c \sim 0.01 \gamma$ пс (для длины сгустка 30 мкм), а интересующий нас временной масштаб намного превышает это значение. В результате получаем

$$z'_1(t') = -z'_2(t') = \frac{1}{2} L_0(\gamma l_0, t').$$

Возвращаясь в лабораторную систему отсчета в момент времени t' , получим

$$z_1(t_1) = \gamma [z'_1(t') + Vt'], \quad z_1(t_2) = \gamma [z'_2(t') + Vt'],$$

$$t_1 = \gamma \left(t' + \frac{Vz'_1}{c^2}\right), \quad t_2 = \gamma \left(t' - \frac{Vz'_2}{c^2}\right).$$

Координаты электронов вновь соответствуют различным моментам времени. Выберем средний из них,

$$t = \frac{t_1 + t_2}{2} = \gamma t' + \gamma \frac{V}{c^2} (z'_1 + z'_2) \approx \gamma t',$$

и вычислим положения электронов для этого момента, полагая, что скорости электронов лишь незначительно отличаются от средней скорости сгустка:

$$\begin{aligned} z_1(t) &= z_1(t_1) - \frac{v_1(t_1) \gamma V z'_1}{c^2} \approx \\ &\approx \gamma [z'_1(t') + Vt'] - \beta^2 \gamma z'_1 = \frac{z'_1}{\gamma} + \gamma V t', \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z_2(t) &= z_2(t_2) + \frac{v_2(t_2) \gamma V z'_2}{c^2} \approx \\ &\approx \gamma [z'_2(t') + Vt'] - \beta^2 \gamma z'_2 = \frac{z'_2}{\gamma} + \gamma V t'. \end{aligned}$$

Длина импульса выражается как

$$\begin{aligned} l(t) &= z_1(t) - z_2(t) = \frac{1}{\gamma} [z'_1(t') - z'_2(t')] = \\ &= \frac{1}{\gamma} L_0(\gamma l_0, t') = \frac{1}{\gamma} L_0\left(\gamma l_0, \frac{t}{\gamma}\right), \end{aligned}$$

где сделан переход ко времени в лабораторной системе t вместо связанного со сгустком времени t' . Окончательное релятивистское соотношение имеет вид

$$L(l_0, t) = \frac{1}{\gamma} L_0\left(\gamma l_0, \frac{t}{\gamma}\right). \quad (3)$$

Заметим, что релятивистский фактор γ входит в это уравнение тремя различными способами, и каждый из них приводит к уменьшению длительности импульса при увеличении γ .

На рис. 7 показано очень хорошее соответствие результатов, полученных при численном моделировании, результатам, полученным при использовании уравнения (3).

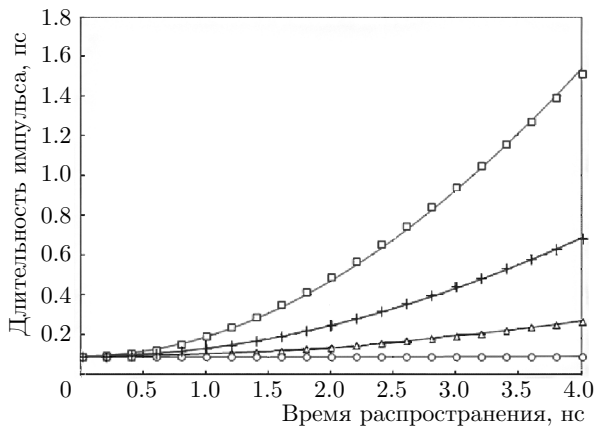


Рис. 7. (В цвете онлайн) Длительности электронного импульса, полученные при моделировании (квадраты — 30 кэВ, кресты — 100 кэВ, треугольники — 300 кэВ, кружки — 3 МэВ). Сплошными линиями показаны оценки согласно (3)

5. ВЫВОДЫ

Результаты применения релятивистских динамических уравнений показывают, что нерелятивистское приближение дает удовлетворительные результаты (с погрешностью 15% и менее) для моделирования удлинения и уширения коротких электронных импульсов при энергиях до 30 кэВ. В то же время результаты такого моделирования могут быть весьма неточными для промежуточных энергий (300 кэВ), а для быстрых релятивистских пучков (3 МэВ) они становятся совершенно неверными.

Использование импульсов высоких энергий (300 кэВ и более) приводит к почти полному исчезновению эффекта кулоновского отталкивания, причем его значительное уменьшение отмечается уже при энергиях выше 100 кэВ. Дисперсия скоростей электронов при высоких энергиях существенно уменьшается. Для электронов с энергией 3 МэВ длительность электронного импульса и его радиус заметно не изменяются даже после его распространения в течение 4 нс, что соответствует расстоянию 1.2 м. Даже при энергии электронов 300 кэВ увеличение длительности импульса пренебрежимо мало для времени распространения 1 нс (расстояние 0.2 м).

Простая аналитическая модель среднего поля, предложенная в работе [13], распространена на быстрые релятивистские электронные импульсы с хорошим соответствием результатам прямого динамического моделирования.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 16-29-1167 ОФИ_м). Один из авторов (Р. Дж. Дуэйн Миллер) выражает благодарность за поддержку Обществу Макса Планка.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. H. Zewail and J. M. Thomas, *4D Electron Microscopy: Imaging in Space and Time*, Imperial College Press, London (2010).
2. A. A. Ischenko and S. A. Aseyev, *Time Resolved Electron Diffraction: For Chemistry, Biology and Material Science*, Elsevier, New York (2014).
3. J. S. Baskin and A. H. Zewail, *C. R. Phys.* **15**, 176 (2014).
4. А. А. Ищенко, С. А. Асеев, В. Н. Баграташвили, В. Я. Панченко, Е. А. Рябов, *УФН* **184**, 681 (2014).
5. А. А. Ищенко, В. Н. Баграташвили, В. В. Голубков, В. Р. Спиридонов, А. В. Згурский, and А. С. Ахманов, *Appl. Phys. B* **32**, 161 (1983).
6. С. А. Ахманов, В. Н. Баграташвили, В. В. Голубков, А. В. Згурский, А. А. Ищенко, С. А. Крикунов, В. П. Спиридонов, В. Г. Тункин, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 157 (1985).
7. A. Gliserin, M. Walbran, F. Krausz, and P. Baum, *Nature Comm.* **6**, 8723 (2015).
8. Б. Н. Миронов, С. А. Асеев, В. Г. Миногин, С. В. Чекалин, *ЖЭТФ* **133**, 1155 (2008).
9. Б. Н. Миронов, В. О. Компанец, С. А. Асеев, А. А. Ищенко, О. В. Мисочко, С. В. Чекалин, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 597 (2016).
10. Б. Н. Миронов, В. О. Компанец, С. А. Асеев, А. А. Ищенко, И. В. Кочиков, О. В. Мисочко, С. В. Чекалин, Е. А. Рябов, *ЖЭТФ* **151**, 494 (2017).
11. А. А. Ischenko, Yu. I. Tarasov, E. A. Ryabov, S. A. Aseyev, L. Schafer, *Fine Chem. Technol.* **12**, 5 (2017).
12. А. А. Ischenko, P. M. Weber, and R. J. Dwayne Miller, *Chem. Rev.* **117**, 11066 (2017).
13. B. J. Siwick, J. R. Dwyer, R. E. Jordan, and R. J. Dwayne Miller, *J. Appl. Phys.* **92**, 1643 (2002).
14. O. J. Luiten, S. B. van der Geer, M. J. de Loos, F. B. Kiewiet, and M. J. van der Wiel, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 094802 (2004).
15. Y. Li, <http://www.pulsar.nl/gpt>.

16. K. Flottmann, S. M. Lidia, and P. Piot, in Proc. of the 2003 Particle Accelerator Conference (2003), p. 3500.
17. B. W. Reed, J. Appl. Phys. **100**, 034916 (2006).
18. M. Michalik and J. E. Sipe, J. Appl. Phys. **99**, 054908 (2006).
19. T. van Oudheusden, E. F. de Jong, S. B. van der Geer, W. P. E. M. O. Root, O. J. Luiten, and B. J. Siwick, J. Appl. Phys. **102**, 093501 (2007).
20. P. Musumeci, M. S. Gutierrez, J. T. Moody, C. M. Scoby, J. B. Rosenzweig, and T. Tran, Phys. Rev. Lett. **100**, 244801 (2008).
21. Y.-E. Sun, P. Piot, A. Johnson, A. H. Lumpkin, T. J. Maxwell, J. Ruan, and R. Thurman-Keup, Phys. Rev. Lett. **105**, 234801 (2010).
22. J. A. Berger and W. A. Schroeder, J. Appl. Phys. **108**, 124905 (2010).
23. T. van Oudheusden, P. L. E. M. Pasmans, S. B. van der Geer, M. J. de Loos, M. J. van der Wiel, and O. J. Luiten, Phys. Rev. Lett. **105**, 264801 (2010).
24. F. Carbone, P. Musumeci, O. J. Luiten, and C. Herbert, Chem. Phys. **392**, 1 (2012).
25. Z. Tao, H. Zhang, P. M. Duxbury, M. Berz, and C.-Y. Ruan, J. Appl. Phys. **111**, 044316 (2012).
26. M. Hada, K. Pichugin, and G. Sciaini, Eur. Phys. J. Special Topics **222**, 1093 (2013).
27. B. L. Beaudoin, J. C. T. Thangaraj, D. Edstrom Jr., J. Ruan, A. H. Lumpkin, D. Broemmelsiek, K. A. Carlson, D. J. Crawford, A. Romanov, J. K. Santucci, G. Stancari, R. Thurman-Keup, and A. Warner, Phys. Plasmas **23**, 103107 (2016).
28. B. S. Zerbe, X. Xiang, C.-Y. Ruan, S. M. Lund, and P. M. Duxbury, Phys. Rev. Accel. Beams **21**, 06421 (2018).
29. H. Grubmüller, H. Heller, A. Windemuth, and K. Schulten, Mol. Simulations **6**, 121 (1991).
30. W. K. H. Panofsky and M. Philips, *Classical Electricity and Magnetism*, Addison-Wesley Publ. Co., Massachusetts (1969).
31. M. Grech, R. Nuter, A. Mikaberidze, P. Di Cintio, L. Gremillet, E. Lefebvre, U. Saalman, J. M. Rost, and S. Skupin, Phys. Rev. E **84**, 056404 (2011).
32. B.-L. Qian and H. E. Elsayed-Ali, J. Appl. Phys. **94**, 803 (2003).
33. B. J. Siwick, J. R. Dwyer, R. E. Jordan, and R. J. Dwayne Miller, J. Appl. Phys. **94**, 807 (2003).
34. B.-L. Qian and H. E. Elsayed-Ali, J. Appl. Phys. **91**, 462 (2002).